Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics, 37, 3, 2025. (117-136)

Ferdowsi University of Mashhad

Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics

Page Journal: mechanic-ferdowsi.um.ac.ir

Society of Manufacturing Engineering of Iran

The Study of the Effect of Functional Parameters of Hydrogen Combustion on Entropy Generation and Enthalpy Variations

Research Article

Ali Asadi[1]

10.22067/jacsm.2025.90295.1288

***Abstract*-- The main objective of this research is to study the impact of combustion performance parameters of hydrogen on entropy generation and enthalpy variations. A numerical simulation was carried out using the counterflow diffusion flame model in the CHEMKIN combustion software. The results showed that increasing the pressure, fuel inlet temperature, and oxidizer inlet temperature led to an increase in the maximum temperature and enthalpy. However, an increase in the oxidizer inlet velocity resulted in a reduction of the maximum temperature and enthalpy. Additionally, increasing the fuel inlet temperature and pressure caused an increase and decrease in the fuel entropy level, respectively.**

***Keywords* Entropy Generation, Enthalpy Variations, Diffusion Flame, Parametric Study, Hydrogen Combustion**

2. Introduction

Energy plays a vital role in sustainable development. Traditional energy systems are unable to meet the environmental and economic requirements for achieving sustainable development, thus there is a pressing need for changes and improvements in energy systems to address the global energy challenges and climate change [1,2]. In this context, attention to combustion performance parameters, entropy generation, and irreversibilities in combustion processes is of great importance. Entropy generation, which refers to the loss or exergy destruction, occurs significantly in combustion processes and leads to energy waste and reduced system efficiency. In many studies, four irreversible phenomena such as chemical reactions, heat transfer, mass transfer, and viscosity dissipation, have been identified as the main contributors to entropy generation [3,4,5].

This study, using the counterflow diffusion flame model, investigates the impact of various performance parameters such as pressure, ambient temperature, and the temperature and velocity of the fuel and oxidizer in hydrogen combustion on entropy generation and enthalpy variations.

3. Governing Equations and Modeling

The governing equations for a diffusion flame include mass conservation, momentum conservation, energy conservation, and species conservation. Figure (1) shows the schematic of the counterflow diffusion flame model used in the present study.

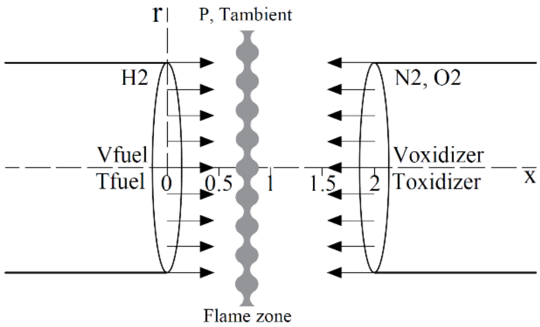


Fig. 1. Schematic of the counterflow diffusion flame model used in the present study

4. Results and Discussion

An increase in pressure resulted in a rise in the maximum temperature, which can be attributed to the enhanced chain breakdown of atoms and the generation of active radicals such as O, H, and OH, leading to an increase in reaction rates, thereby elevating the maximum temperature. Due to the increased number of active radicals, the location of the maximum temperature shifted toward the fuel side. Moreover, the increase in pressure led to a decrease in entropy. This reduction in entropy was due to a decrease in the disorder and chaotic motion of molecules and atoms, resulting from the higher pressure. Additionally, an increase in pressure caused an increase in sensible enthalpy, as it enhanced the reaction rates, temperature, and consequently, heat production, which led to a rise in enthalpy. The rate of increase in enthalpy due to pressure gradually decreased.

Overall, increasing the ambient temperature from 100 K to 400 K had a negligible effect on temperature, entropy, and sensible enthalpy. Since the combustion temperature

* Manuscript received October 16, 2024, Revised November 25, 2024, Accepted March 1, 2025.

1 Assistant Professor, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Bozorgmehr University of Qaenat, Qaen, Iran.

of hydrogen is much higher than the ambient temperature, around 2500 K, increasing the ambient temperature within this range does not significantly affect the system.

Increasing the fuel inlet temperature led to an increase in the maximum temperature. Raising the fuel inlet temperature not only increased the reaction rates for producing active radicals (H and OH) through higher H2 species temperature but also raised the flame zone temperature, thus enhancing the overall combustion reaction rate. The rise in fuel inlet temperature also increased fuel entropy due to the higher temperature, molecular motion, and energy levels. Concerning the impact of fuel inlet temperature on sensible enthalpy, three important points were observed. First, at a fuel inlet temperature of 200 K, the enthalpy was negative, indicating an endothermic process. Second, an increase in the fuel inlet temperature resulted in a rise in maximum enthalpy due to elevated temperatures, higher radical production rates, and increased reaction rates. Third, at a fuel inlet temperature of 500 K, the fuel underwent pre-ignition or auto-ignition before reaching the flame zone.

Increasing the oxidizer inlet temperature raised the maximum temperature. The increase in maximum temperature was more significant compared to when the fuel inlet temperature was increased. Another noteworthy point is that the position of the maximum temperature shifted toward the oxidizer side, owing to the increased rate of active O radical production in the oxidizer region. Increasing the oxidizer inlet temperature did not significantly affect the entropy of the fuel and oxidizer but did increase the entropy in the flame zone. Additionally, it led to an increase in the maximum sensible enthalpy.

Increasing the fuel inlet velocity had a minimal effect on the maximum temperature, and at higher velocities, it even slightly reduced the maximum temperature, possibly due to the cooling effect in the flame zone from the high-speed fuel flow and the reduced reaction rates.

Increasing the fuel inlet velocity did not notably affect the entropy levels on the fuel and oxidizer sides. However, in the flame zone, entropy increased. The changes in sensible enthalpy due to the increase in fuel inlet velocity were also insignificant, and at higher velocities, the maximum enthalpy decreased.

Increasing the oxidizer inlet velocity caused a reduction in the maximum temperature. This was attributed to several factors: first, the higher oxidizer flow velocity cooled the flame zone, which led to a decrease in temperature and consequently a reduction in active radical production rates, thus decreasing the reaction rates. Second, the oxidizer region contains N2 and O2 species, with the active radical in this region being O, which has a lower mole fraction than the active radicals on the fuel side (H and OH) and thus has a lesser impact on increasing the reaction rates. Third, N2, which largely remains unaffected in the flame zone, acts as a diluent. In addition to reducing the temperature through dilution, N2 reacts with active O radicals, forming NOx pollutants, further lowering the reaction rates and reducing the maximum temperature.

Increasing the oxidizer inlet velocity did not significantly affect the entropy levels on the fuel and oxidizer sides. However, in the flame zone, the entropy decreased significantly. The changes in sensible enthalpy due to the increase in oxidizer inlet velocity followed a decreasing trend, which was linked to the reduction in maximum temperature, a subsequent decrease in active radical production, and ultimately a decline in reaction rates.

5. Conclusion

In this study, a parametric analysis of hydrogen combustion in a diffusion flame model was conducted, and the effects of combustion performance parameters on entropy generation and enthalpy changes were investigated. The model used was an opposing flow model, and simulations were carried out using the CHEMKIN simulation software. Some of the key findings from the present study are as follows:

- The entropy level in the flame zone decreased significantly, which was attributed to the large heat transfer to the environment in the flame zone.
- The sensible enthalpy in the flame zone increased significantly. The positive value of enthalpy indicates that the combustion reaction process in this zone is exothermic.
- Increasing pressure, which enhances the reaction rates, resulted in a rise in temperature. The increase in pressure also caused a reduction in the fuel's entropy. Additionally, the effect of pressure increase on sensible enthalpy was observed as an elevation in the maximum enthalpy value.
- Environmental temperature changes had no significant effect on temperature, entropy, and sensible enthalpy.
- Increasing the fuel inlet temperature raised both the maximum temperature and sensible enthalpy and increased the fuel’s entropy. However, in the flame zone, the entropy decreased. A significant increase in fuel inlet temperature up to 500 K caused the fuel to undergo auto-ignition or pre-ignition before reaching the flame zone.
- Increasing the oxidizer inlet temperature raised the maximum temperature and sensible enthalpy but did not have a significant impact on the entropy of the fuel and oxidizer. In the flame zone, the entropy increased with the increase in the oxidizer inlet temperature.
- Increasing the fuel inlet velocity had little effect on the maximum temperature, maximum sensible enthalpy, and the entropy of the fuel and oxidizer. However, it increased the entropy in the flame zone.
- Increasing the oxidizer inlet velocity reduced both the maximum temperature and sensible enthalpy. Although increasing the oxidizer inlet velocity had little effect on the entropy of the fuel and oxidizer, it caused a reduction in entropy in the flame zone.

References

[1] A. Asadi and M. Yadegari, "The study of the effect of fuel dilution in methane/air counterflow diffusion flames on the emission of environmental pollutants," *Journal of Mechanical Engineering*, vol. 33, no. 6, pp. 25–34, 2024. [In Persian]. https://doi.org/10.30506/mmep.2024.2025565.2166

[2] J. Khadem and A. Asadi, "Numerical study on counterflow diffusion flames of natural gas with CO_2 dilution," *Fuel and Combustion*, vol. 4, no. 2, pp. 17–28, 2012. [In Persian].

[3] A. Asadi, "The Study of the Effect of Lewis Number on the Laminar Diffusion Flames," *Journal of Mechanical Engineering*, vol. 33, no. 5, pp. 3-13, 2024. [In Persian] https://doi.org/10.30506/mmep.2024.2033635.2180

[4] A. Asadi and J. Khadem, "The Numerical Study of Extinction Limits and Structure of H_2/O_2 Counterflow Diffusion Flame with Ar and He Dilution," *Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, vol. 24, no. 2, 2013, [In Persian].

[5] L. Acampora and F. S. Marra, "Effects of Soret diffusion on the exergy losses in hydrogen laminar premixed flames," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 48, no. 73, pp. 28539-28548, 2023. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.03.168

علوم کاربردی و محاسباتی در مکانیک،۳۷، ۳، ۱۴۰۴. (۱۳۶-۱۱۷)

علوم کاربردی و محاسباتی در مکانیک

http://mechanic-ferdowsi.um.ac.ir

انجمن مهندسی ساخت و تولید ایران

دانشگاه فردوسی مشهد

مطالعه تأثیر پارامترهای عملکردی احتراق هیدروژن بر تولید انتروپی و تغییرات آنتالپی*

مقاله پژوهشی

علی اسدی(۱)

DOI: 10.22067/jacsm.2025.90295.1288

چکیده *تولید انتروپی و تغییرات آنتالپی از پارامترهای مهم در احتراق هیدروژن به شمار می‌رود. هدف اصلی در این پژوهش مطالعه تأثیر پارامترهای عملکردی احتراق هیدروژن بر تولید انتروپی و تغییرات آنتالپی است. شبیه‌سازی عددی با استفاده از مدل جریان مخالف نرم‌افزار احتراق کمکین انجام گردید. جریان آرام در نظر گرفته شد. جمله نفوذ به روش تفاضل مرکزی و جمله جابه‌جایی به روش بالا دست منفصل شد. معادلات منفصل شده با استفاده از حلگر دو نقطه‌ای و انتگرال‌گیری زمانی حل گردید. سپس اثر پارامترهای فشار و دمای محیط و همچنین دما و سرعت ورودی سوخت و اکسید کننده بر تولید انتروپی و تغییرات آنتالپی بررسی گردید. نتایج نشان داد که افزایش فشار، دمای ورودی سوخت و دمای ورودی اکسید کننده منجر به افزایش ماکزیمم دما و آنتالپی گردید. اما افزایش سرعت ورودی اکسید کننده، ماکزیمم دما و آنتالپی را کاهش داد. همچنین افزایش دمای ورودی سوخت و افزایش فشار به ترتیب سطح انتروپی سوخت را افزایش و کاهش داد. افزایش دمای ورودی سوخت و سرعت ورودی اکسید کننده سطح انتروپی در ناحیه شعله را کاهش و افزایش دمای ورودی اکسید کننده و سرعت ورودی سوخت آن را کاهش داد.*

واژه‌های کلیدی تولید انتروپی، تغییرات آنتالپی، شعله نفوذی، مطالعه پارامتری، احتراق هیدروژن.

مقدمه

بدون شک تولید انرژی یکی از عوامل مهم در توسعه پایدار است. در کنار تولید انرژی، حفاظت از محیط زیست بسیار اهمیت دارد [1,2]. سیستم‌های انرژی سنتی قادر به برآورده کردن الزامات زیست محیطی و اقتصادی برای توسعه پایدار نیستند. بنابراین، تغییر در سیستم‌های انرژی هم برای تامین افزایش تقاضای جهانی انرژی و هم برای مقابله با تغییرات اقلیمی مورد نیاز است. برای توسعه یا بهبود سیستم‌های انرژی نیاز است تا به پارامترهای عملکردی احتراق، مسئله تولید انتروپی و بازگشت ناپذیری‌ها توجه ویژه‌ای داشت [3-5].

تولید انتروپی به معنی از دست دادن یا تلفات اگزرژی است. فرایندهای احتراقی یکی از مقوله‌هایی است که تلفات اگزرژی یا تولید انتروپی در آن به مقدار زیادی پدیدار می‌گردد. به همین دلیل محققان مختلفی به بررسی موضوع بازگشت ناپذیری و تولید انتروپی پرداخته‌اند. به عنوان مثال مطالعاتی که در زمینه شعله‌های پیش آمیخته آرام [6-8] یا احتراق با حجم ثابت [9] انجام گرفته است. تولید انتروپی یا تلفات اگزرژی در این فرایندها با چهار پدیده بازگشت ناپذیر ارتباط دارد: واکنش‌های شیمیایی، انتقال گرما، انتقال جرم و اتلافات ویسکوزیته [10].

مطالعات پارامتری مبتنی بر ترمودینامیک تعادلی در آشکار کردن مکانیزم‌های میکروسکوپی تخریب اگزرژی، به ویژه برای تخریب اگزرژی توسط واکنش شیمیایی کارآمد نیستند [11]. به همین دلیل برخی از محققان تلاش کردند تا ویژگی‌های تولید آنتروپی محلی و تخریب اگزرژی شعله‌های پیش‌آمیخته و غیر

* تاریخ دریافت مقاله ۱۴۰۳/۷/۲۵ و تاریخ پذیرش آن ۱۴۰۳/۱۲/۱۱ می باشد.

(۱) نویسندهٔ مسئول، استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه بزرگمهر قائنات، قائن.

Email: a_asadi@buqaen.ac.ir

پیش آمیخته را بررسی کنند تا جزئیات بیشتری را روشن کنند [8,12,13].

نیشیدا و همکاران [14] تولید انتروپی محلی و اتلاف اگزرژی ناشی از فرایندهای برگشت ناپذیر اتلاف ویسکوز، هدایت حرارتی، انتشار جرم و واکنش شیمیایی را در شعله‌های پیش آمیخته متان و هیدروژن مورد بررسی قرار دادند. در این پژوهش اثرات نسبت هم‌ارزی و دمای سیال ورودی بر تولید انتروپی مورد مطالعه قرار گرفت. واکنش شیمیایی، فرایند غالب برای از دست دادن اگزرژی در شعله‌های پیش آمیخته است.

کاهش صدای احتراق برای جلوگیری از ناپایداری‌های ترموآکوستیک در موتورهای موشک و توربین گاز بسیار مهم است. نویز انتروپی، ناشی از نوسانات انتروپی در موتور، به عنوان یک منبع نویز برجسته عمل می‌کند. بنابراین، درک مکانیزم‌های حاکم بر تولید انتروپی در شعله برای شناسایی ریشه‌های صدای احتراق ضروری است. به همین منظور سو و همکاران [15] در پژوهشی به بررسی اثر نرخ کرنش و فشار بر تولید انتروپی پرداختند. نتایج این پژوهش نشان داد که انتقال گرما جزء اصلی منبع انتروپی است و آنتالپی محسوس نیز تا حدی در این زمینه تأثیرگذار است. همچنین تغییرات کرنش و فشار تا حد زیادی می‌تواند منبع انتروپی کل را کاهش دهد.

برای حل مسئله ارزیابی بازده قانون دوم برای مبدل‌های حرارتی، ژائو [16] یک روش کارایی-تأثیر از تئوری همرفت خالص ایجاد کرد که در آن بازده انتقال انتروپی به عنوان نسبت دمای خروجی سیالات سرد و گرم در تبادل انتروپی و تولید انتروپی محلی تعریف می‌شود. نتایج آن‌ها نشان داد که روش اختلاف دمای خطی که بر اساس ضرایب انتقال حرارت همرفتی و کلی تعریف شده می‌تواند در زمینه ارزیابی بازده قانون دوم اثربخشی داشته باشد.

رونگ و ژائو [17] تحلیل ترمودینامیکی و تولید انتروپی عملکرد حرارتی احتراق‌های مقیاس مزو در کانال‌های جریان نوع تسلا-ویل را بررسی کردند. در این پژوهش اثرات نرخ‌های جریان حجمی هیدروژن و نسبت‌های هم‌ارزی مختلف مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج آن‌ها نشان داد که در احتراق‌های ساختاری تسلا، احتراق تقریبا کامل قبل از رسیدن نسبت هم‌ارزی به ۰٫۹ حاصل می‌شود و بازده احتراق به تدریج پس از رسیدن نسبت هم‌ارزی به ۱ کاهش می‌یابد.

اثر ترکیبات قلیایی در شعله‌های جریان مخالف متان و گاز مایع (۳۸ درصد جرمی پروپان و ۶۲ درصد جرمی n-بوتان) به وسیله بادهاک و راویکریشنا [18] بررسی گردید. مدل‌های عددی آن‌ها به طور کیفی با روند نتایج تجربی مطابقت دارد. آنالیز دقیق حساسیت و نمودار مسیر واکنش نشان می‌دهد که ثابت‌های سرعت واکنش‌های نو ترکیب، انتروپی گونه‌ها و قطر برخورد نیاز به بررسی دقیق برای بهبود پیش‌بینی‌های مدل دارد.

ژائو و همکاران [19] به صورت عددی قانون اول و دوم را برای میکرو احتراق‌های دو کاناله جریان مخالف تحلیل کردند. یک آنالیز پارامتری برای تعیین تأثیر سرعت ورودی، هندسه محفظه و ترکیب سوخت بر دمای میانگین دیواره، یکنواختی دمای دیواره و ویژگی‌های قانون دوم انجام گردید. نتایج این پژوهش نشان داد که افزایش سرعت ورودی، منجر به افزایش میانگین دمای دیواره شد و یکنواختی دمای دیواره کمی کاهش یافت. همچنین نتایج آن‌ها نشان داد که واکنش‌های شیمیایی سهم بزرگی در تولید انتروپی دارد.

در پژوهشی مروری توسط سادیکی و همکاران [20] تولید انتروپی در سیستم‌های احتراق آشفته مورد مطالعه قرار گرفت. آن‌ها پارامترهای مختلف شامل مرز بندی دیواره، شرایط جریان، رژیم‌های احتراق، سوخت‌های جایگزین و هندسه را مورد بررسی قرار دادند. در این پژوهش با در نظر گرفتن معادلات انتقال انتروپی در هر دو مدل ناویر-استوکس با میانگین رینولدز و مدل‌سازی شبیه‌سازی گردابی بزرگ، حالت‌های مدل‌سازی متفاوتی از شرایط تولید انتروپی مورد بحث قرار گرفت. آن‌ها آنالیز تولید انتروپی را به عنوان یک ابزار امیدوار کننده برای بهینه‌سازی سیستم‌های احتراقی معرفی کردند.

یک استر اتژی ساده برای بررسی تولید انتروپی در شعله‌های پیش آمیخته طبقه‌بندی شده، به وسیله درسلر و همکاران [21] ارائه گردید. رویکرد مدل‌سازی مبتنی بر استراتژی جدول بندی شیمی، شبیه‌سازی گردابه‌های بزرگ و روش میدان تصادفی اویلری بود. نتایج نشان داد که سهم تولید انتروپی از طریق اختلاط ناشی از واکنش شیمیایی بسیار زیاد است.

یان و همکاران [22] از تحلیل ترمودینامیکی برای ارزیابی برگشت ناپذیری فرایند احتراق و بهبود راندمان استفاده کردند. نتایج نشان داد که با افزایش غلظت اکسیژن در اکسید کننده، تولید انتروپی تشعشعی ابتدا افزایش و سپس کاهش یافت و تولید

انتروپی همرفتی و هدایتی، تولید انتروپی انتقال جرم، تولید انتروپی شیمیایی و تولید انتروپی کل به تدریج افزایش پیدا کرد.

یک بررسی جامع از احتراق آشفته برای مطالعه رابطه بین تشکیل اکسید نیتروژن و توزیع تولید انتروپی در احتراق پروپان غیر پیش آمیخته انجام شد [23]. انتقال حرارت تشعشع و احتراق به ترتیب با استفاده از مدل اردینات گسسته و مدل شعله‌های آرام شبیه‌سازی گردید. نتایج نشان داد که نرخ تولید انتروپی کل نسبت به نرخ تشکیل اکسید نیتروژن به دمای بالا حساس‌تر است. با افزایش ۲۸٫۷ درصدی دما، تولید انتروپی و نرخ تشکیل اکسید نیتروژن به ترتیب ۹۰۰ درصد و ۱۲۷ درصد افزایش یافت.

یک روش جدید برای تخمین انتروپی غیر تعادلی تولید شده در یک شعله متان پیش آمیخته توسط یو و وو [24] پیشنهاد شد. در این پژوهش شعله‌های متان پیش آمیخته جریان مخالف به صورت عددی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که نرخ کرنش اثر ضعیفی بر برگشت ناپذیری انتقال جرم و هدایت حرارتی داشت، اما اثر قوی بر برگشت ناپذیری شیمیایی داشت. کومار و همکاران [25] ویژگی‌های شعله و پایداری را در شعله‌های جریان مخالف بیوگاز مطالعه کردند. شبیه‌سازی‌های عددی با استفاده از ماژول جریان واکنش‌پذیر در نرم‌افزار اپن فوم انجام شد. همچنین اثرات محتوای دی اکسید کربن در بیوگاز، دمای سوخت و افزودن هیدروژن به جریان‌های سوخت یا هوا بررسی گردید. نتایج نشان داد که دمای شعله با افزایش درجه پیش گرم واکنش دهنده‌ها افزایش یافت و شعله‌ها پایداری بهتری با جریان هوای از پیش گرم شده نشان دادند. پیش گرم کردن هوا همچنین به کاهش قابل توجه تولید انتروپی کمک کرد.

با بررسی پژوهش‌های انجام شده در زمینه تولید انتروپی در فرایندهای احتراقی در میابیم که اگر چه مطالعات مختلفی بر روی این موضوع انجام شده است، اما مطالعه‌ای مبنی بر بررسی تأثیر پارامترهای عملکردی احتراق بر تولید انتروپی صورت نپذیرفته است. از طرفی با توجه به اینکه انتقال گرما یکی از مکانیزم‌های مهم انتقال انتروپی می‌باشد و این مکانیزم بر اساس پارامتر کلیدی آنتالپی محسوس عمل می‌کند، نیاز است تا اثر پارامترهای عملکردی احتراق بر آنتالپی محسوس نیز بررسی گردد. از این طریق می‌توان با تغییر در پارامترهای عملکردی احتراق و بدون صرف هزینه و زمان زیاد، تا حد زیادی تغییرات آنتالپی و تولید انتروپی را کنترل نموده، از اتلافات جلوگیری کرده و راندمان احتراق را افزایش داد. بنابراین در پژوهش حاضر یک مطالعه جامع و دقیق بر روی تأثیر پارامترهای عملکردی مختلف احتراق از جمله فشار و دمای محیط و همچنین دما و سرعت ورودی جریان‌های سوخت و اکسید کننده بر تولید انتروپی و تغییرات آنتالپی صورت پذیرفت. مدل مورد استفاده در پژوهش حاضر، مدل شعله جریان مخالف نفوذی است.

معادلات حاکم

معادلات حاکم برای شعله نفوذی به صورت زیر است [26].

معادله بقای جرم:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u)+\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(\rho v r)=0 \qquad (۱)$$

که در آن u و v مؤلفه‌های سرعت شعاعی و محوری و ρ چگالی است. بنا به فرضیه ون کارمان (که در آن v/r و سایر متغیرها بایستی فقط تابعی از x باشند)، داریم:

$$G(x)=-\frac{\rho v}{r} \quad , \quad F(x)=\frac{\rho u}{2} \qquad (۲)$$

با جایگذاری F و G در معادله پیوستگی و برخی ساده‌سازی‌ها داریم:

$$G(x)=\frac{dF(x)}{dx} \qquad (۳)$$

معادلات مومنتم محوری و شعاعی به صورت زیر هستند:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho uur)+\frac{\partial}{\partial r}(\rho vur)=\frac{\partial}{\partial r}(r\tau_{rx})+r\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x}-r\frac{\partial P}{\partial x}+\rho g_x r$$
$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho uvr)+\frac{\partial}{\partial r}(\rho vvr)=\frac{\partial}{\partial r}(r\tau_{rr})+r\frac{\partial \tau_{rx}}{\partial x}-r\frac{\partial P}{\partial r} \qquad (۴)$$

که در آن $\tau_{rr}=\mu\left[2\frac{\partial v}{\partial r}-\frac{2}{3}(\nabla.V)\right]$ و $\tau_{rx}=\mu\left[2\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{\partial v}{\partial x}\right]$ و $\tau_{xx}=\mu\left[2\frac{\partial u}{\partial x}-\frac{2}{3}(\nabla.V)\right]$ است. با ساده‌سازی و نوشتن معادلات بر حسب توابع F و G نتیجه می‌شود:

$$\frac{d}{dx}\left[\frac{F^2}{\rho}-\mu\frac{d}{dx}\left(\frac{F}{\rho}\right)\right]+\frac{1}{2}\mu\frac{d}{dx}\left(\frac{G}{\rho}\right)-\frac{FG}{\rho}+\frac{1}{4}\left(\frac{\partial P}{\partial x}-\rho g_x\right)=0$$
$$H-2\frac{d}{dx}\left(\frac{FG}{\rho}\right)+\frac{3G^2}{\rho}+\frac{d}{dx}\left[\mu\frac{d}{dx}\left(\frac{G}{\rho}\right)\right]=0 \qquad (۵)$$

که در آن $H=\frac{1}{r}\frac{\partial P}{\partial r}=constan$. معادلات دیگر، بقای گونه‌ها و انرژی هستند. معادله‌ی بقای گونه‌ها (برای جریان پایدار، $\frac{dm_{c.v}}{dt}=0$) به صورت زیر می‌باشد:

$$(\dot{m}''_i A)_x-(\dot{m}''_i A)_{x+\Delta x}+\dot{m}'''\forall=0 \qquad (۶)$$

با توجه به اینکه $\dot{m}''_i=\dot{m}''_{i,diff}+\dot{m}''Y_i$ و $\dot{m}''_{i,diff}=$

و با توجه به برابری $\rho Y_i V_i = \dot{\omega}_k W_k = \dot{m}'''$ شکل نهایی معادله به صورت زیر است:

$$\rho u \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx}(\rho Y_k V_k) - \dot{\omega}_k W_k = 0\ ;\ \ k = 1, \dots, K \qquad (۷)$$

که در این رابطه $\dot{\omega}_k$ و W_k به ترتیب نرخ تولید یا مصرف گونه‌ی K ام و وزن مولکولی گونه‌ی K ام است. معادله‌ی بقای انرژی به شکل زیر است:

$$\left(\dot{Q}''_x A\right)_x - \left(\dot{Q}''_x A\right)_{x+\Delta x} - \dot{W}_{c.v} = \dot{m}'' A\left[\left(h + \frac{u^2}{2} + gz\right)_{x+\Delta x} - \left(h + \frac{u^2}{2} + gz\right)_x\right] \qquad (۸)$$

که در این رابطه g، z، h، $\dot{W}_{c.v}$ و $\dot{Q}''_x$ به ترتیب شتاب گرانش زمین، ارتفاع از سطح پتانسیل، آنتالپی، کار و گرمای عبوری از سطح کنترل در جهت x هستند. معادله برای حالت پایدار نوشته شده و کاری انجام نمی‌شود. از تغییرات انرژی پتانسیل نیز صرف نظر می‌شود، بنابراین:

$$-\frac{d\dot{Q}''_x}{dx} = \dot{m}''\left(\frac{dh}{dx} + u\frac{du}{dx}\right) \qquad (۹)$$

$\dot{Q}''_x$ که شامل دو عبارت هدایت و نفوذ گونه‌ها است، از رابطه‌ی زیر بدست می‌آید:

$$\dot{Q}''_x = -\lambda \nabla T + \sum \dot{m}''_{i,diff}\, h_i \qquad (۱۰)$$

که در آن λ هدایت حرارتی است و همچنین داریم:

$$\left.\begin{aligned}\sum Y_i h_i &= h\\ \dot{m}'' &= \rho u\end{aligned}\right\} \qquad (۱۱)$$

با برخی ساده‌سازی‌ها در نهایت معادله انرژی به صورت زیر در می‌آید:

$$\rho u \frac{dT}{dx} - \frac{1}{C_p}\frac{d}{dx}\left(\lambda \frac{dT}{dx}\right) + \frac{\rho}{C_p}\sum_k C_{pk} Y_k V_k \frac{dT}{dx} + \frac{1}{C_p}\sum_k h_k \dot{\omega}_k = 0 \qquad (۱۲)$$

که در آن C_p ظرفیت گرمایی ویژه فشار ثابت است و سرعت‌های نفوذی به شکل زیر هستند:

$$V_k = \frac{1}{X_k \overline{W}} \sum_{j=1}^{K} W_j D_{kj} \frac{dX_j}{dx} - \frac{D_k^T}{\rho Y_k}\frac{1}{T}\frac{dT}{dx} \qquad (۱۳)$$

یا به فرم میانگین برای ترکیب داریم:

$$V_k = \frac{1}{X_k} D_{km} \frac{dX_k}{dx} - \frac{D_k^T}{\rho Y_k}\frac{1}{T}\frac{dT}{dx} \qquad (۱۴)$$

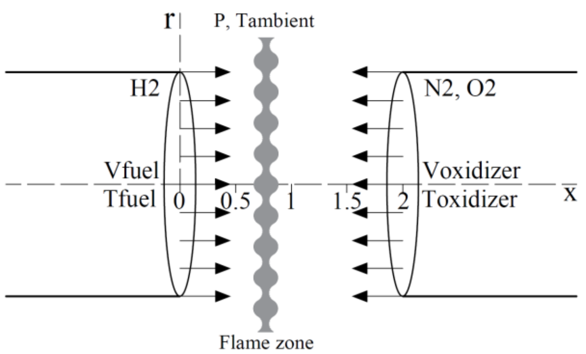
که در آن $D_{km} = \frac{1-Y_k}{\sum_{j\neq k}^{K} X_j/\mathcal{D}_{jk}}$ است. D_{kj}، D_{km}، $\mathcal{D}_{jk}$ و D_k^T به ترتیب ضرایب چند جزئی، میانگین ترکیب، دوتایی و نفوذ حرارتی می‌باشند. شرایط مرزی برای جریان‌های سوخت (F) و اکسیدکننده (O) در نازل‌ها به شکل زیر هستند:

$$x=0:\ F = \frac{\rho_F u_F}{2}\ ,\ G=0\ ,\ T=T_F\ ,\ \rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_F$$
$$x=L:\ F = \frac{\rho_o u_o}{2}\ ,\ G=0\ ,\ T=T_o\ ,\ \rho u Y_k + \rho Y_k V_k = (\rho u Y_k)_o \qquad (۱۵)$$

شرایط مرز ورودی، شار جرمی کلی، شامل نفوذ و جابه‌جایی را نسبت به کسر گونه‌ها $(Y_k = Y_{k,F})$ مشخص می‌کند. حل معادلات با استفاده از OPPDIF [27] که یک کد عددی به زبان فرترن در مجموعه نرم‌افزاری شبیه‌ساز احتراق کمکین است، انجام پذیرفت.

مدل‌سازی

شکل (۱) شماتیک مدل شعله جریان مخالف نفوذی مورد استفاده در پژوهش حاضر را نشان می‌دهد. مدل مذکور از دو نازل هم محور تشکیل شده که فاصله دهانه دو نازل ۲cm در نظر گرفته شده است. ناحیه شعله در حد فاصل دهانه دو نازل تشکیل می‌شود. بسته به واکنش‌های شیمیایی و مقدار مومنتم جریان‌های سوخت و اکسید کننده ناحیه شعله می‌تواند به سمت نازل سوخت یا نازل اکسید کننده جابه‌جا شود.



شکل ۱ شماتیک مدل شعله جریان مخالف نفوذی مورد استفاده در پژوهش حاضر

سوخت مورد استفاده در این پژوهش H_2 با مکانیزم شیمیایی جدول (۱) و اکسید کننده، هوا به صورت ترکیبی از N_2 و O_2 است. کسر مولی نیتروژن و اکسیژن در اکسید کننده به ترتیب ۰٫۷۹ و ۰٫۲۱ در نظر گرفته شده است. پارامترهای مورد مطالعه و مقادیر مختلف آن در جدول (۲) ارائه شده است.

جدول ۱ مکانیزم شیمیایی H_2 مورد استفاده در پژوهش حاضر

شماره واکنش	واکنش	$k=AT^b exp(-E/RT)$		
		A	b	E
۱	$H+O_2+M=HO_2+M$	$۳٫۶۱\times ۱۰^{۱۷}$	−۰٫۷	۰
۲	$H+H+M=H_2+M$	۱×۱۰^{۱۸}	−۱	۰
۳	$H+H+H_2=H_2+H_2$	$۹٫۲\times ۱۰^{۱۶}$	−۰٫۶	۰
۴	$H+H+H_2O=H_2+H_2O$	۶×۱۰^{۱۹}	−۱٫۲	۰
۵	$H+OH+M=H_2O+M$	$۱٫۶\times ۱۰^{۲۲}$	−۲	۰
۶	$H+O+M=OH+M$	$۶٫۲\times ۱۰^{۱۶}$	−۰٫۶	۰
۷	$O+O+M=O_2+M$	$۱٫۸۹\times ۱۰^{۱۳}$	۰	−۱۷۸۸
۸	$H_2O_2+M=OH+OH+M$	$۱٫۳\times ۱۰^{۱۷}$	۰	۴۵۵۰۰
۹	$H_2+O_2=2OH$	$۱٫۷\times ۱۰^{۱۳}$	۰	۴۷۷۸۰
۱۰	$OH+H_2=H_2O+H$	$۱٫۱۷\times ۱۰^{۹}$	۱٫۳	۳۶۲۶
۱۱	$O+OH=O_2+H$	$۳٫۶۱\times ۱۰^{۱۴}$	−۰٫۵	۰
۱۲	$O+H_2=OH+H$	$۵٫۰۶\times ۱۰^{۴}$	۲٫۷	۶۲۹۰
۱۳	$OH+HO_2=H_2O+O_2$	$۷٫۵\times ۱۰^{۱۲}$	۰	۰
۱۴	$H+HO_2=2OH$	$۱٫۴\times ۱۰^{۱۴}$	۰	۱۰۷۳
۱۵	$O+HO_2=O_2+OH$	$۱٫۴\times ۱۰^{۱۳}$	۰	۱۰۷۳
۱۶	$2OH=O+H_2O$	۶×۱۰^{۸}	۱٫۳	۰
۱۷	$H+HO_2=H_2+O_2$	$۱٫۲۵\times ۱۰^{۱۳}$	۰	۰
۱۸	$HO_2+HO_2=H_2O_2+O_2$	۲×۱۰^{۱۲}	۰	۰
۱۹	$H_2O_2+H=HO_2+H_2$	$۱٫۶\times ۱۰^{۱۲}$	۰	۳۸۰۰
۲۰	$H_2O_2+OH=H_2O+HO_2$	۱×۱۰^{۱۳}	۰	۱۸۰۰

جدول ۲ مقادیر مختلف پارامترهای مورد مطالعه در پژوهش حاضر

ردیف	فشار P (atm)	دمای محیط $T_{ambient}$ (K)	دمای سوخت T_{fuel} (K)	دمای اکسید کننده $T_{Oxidizer}$ (K)	سرعت سوخت V_{fuel} (cm/s)	سرعت اکسید کننده $V_{Oxidizer}$ (cm/s)
۱	۱	۱۰۰	۲۰۰	۲۰۰	۱۰	۱۰
۲	۱۰	۲۰۰	۳۰۰	۳۰۰	۱۰۰	۱۰۰
۳	۲۰	۳۰۰	۴۰۰	۴۰۰	۲۰۰	۲۰۰
۴	۳۰	۴۰۰	۵۰۰	۵۰۰	۳۰۰	۳۰۰

نتایج

برای حل معادلات پژوهش حاضر از کد عددی OPPDIFF استفاده شده که به طور خاص برای مدل مورد استفاده در این پژوهش برنامه‌ریزی شده است و این مدل در مجموعه کمکین به صورت گرافیکی طراحی شده است. بنابراین صحت شبکه‌بندی و استقلال از شبکه از قبل بررسی گردیده و در مدل مورد مطالعه صرفا اطلاعات هندسی و شرایط مرزی به عنوان ورودی تعیین گردید. همچنین اعتبار کد عددی و مدل مورد استفاده در پژوهش حاضر، در پژوهش‌های دیگری [4-1] از نویسنده همین مقاله بررسی گردیده است و از این نظر با اعتماد و اطمینان می‌توان از مدل مورد استفاده در پژوهش حاضر در شبیه‌سازی فرایندهای احتراقی استفاده نمود. در ادامه نتایج شبیه‌سازی احتراق هیدروژن در مدل شعله نفوذی ارائه می‌گردد. نتایج در دو بخش، تحت عناوین احتراق هیدروژن و اثر پارامترهای عملکردی احتراق

هیدروژن بر تولید انتروپی و تغییرات آنتالپی ارائه می‌شود.

احتراق هیدروژن. شکل‌های (a–۲) تا (e–۲) به ترتیب منحنی پارامترهای دما، انتروپی، آنتالپی محسوس، کسر مولی گونه‌های H_2، N_2، O_2 و H_2O و کسر مولی رادیکال‌های H، O و OH بر حسب فاصله دهانه دو نازل را نشان می‌دهد. شکل‌های (f–۲) و (g–۲) آنالیز مسیر واکنش احتراق هیدروژن و واکنش‌های فعال در سمت سوخت، ناحیه شعله و سمت اکسید کننده که از آنالیز مسیر واکنش به دست آمده است را نشان می‌دهد. نمودارهای شکل (۲) به نحوی قرار داده شده است تا بتوان درک صحیح و جامعی از احتراق هیدروژن در مدل جریان مخالف کسب کرد.

سه ناحیه در این شکل به کمک سه پیکان خط چین مشخص شده است. ناحیه اول، سمت سوخت (x=۰٫۱cm) است که جریان سوخت در آن قرار دارد و قبل از ناحیه شعله است. ناحیه دوم، ناحیه شعله (x=۰٫۶۵cm) است که در آن واکنش‌های مکانیزم کلی با نرخ بالایی انجام می‌گیرد. ناحیه سوم، سمت اکسید کننده (x=۰٫۹۵cm) است که گونه‌های حاضر در اکسید کننده در این ناحیه جریان دارد.

با دقت در شکل (a–۲) مشاهده می‌شود که دمای سوخت و اکسید کننده در دو طرف نمودار برابر ۳۰۰K است. این دما به عنوان دمای ورودی برای سوخت و اکسید کننده در دهانه نازل در نظر گرفته شده بود. با حرکت به سمت میانه منحنی، به ناحیه احتراق نزدیک می‌شویم. جایی که رفته رفته زنجیره واکنش‌های احتراق شروع شده و دما افزایش یافته است (ناحیه شعله). ماکزیمم دما حدودا در x=۰٫۶۵cm اتفاق افتاد. علت این که موقعیت ماکزیمم دما به سمت سوخت نزدیک‌تر است، آن است که با شروع شکست زنجیره اتم‌ها در سمت سوخت، رادیکال‌های فعال H و OH زیادی در این ناحیه از گونه H_2 تولید می‌شود و حضور این رادیکال‌های فعال در کنار سوخت و سایر گونه‌های میانی باعث افزایش نرخ انجام واکنش‌ها در نزدیکی سمت سوخت شده و بنابراین دمای ناحیه شعله بالا می‌رود تا به مقدار ماکزیمم خود می‌رسد.

شکل (b–۲) نشان می‌دهد که مقدار ماکزیمم کسر مولی گونه H در موقعیت ماکزیمم دما اتفاق می‌افتد. ماکزیمم گونه OH و O نیز در نزدیکی همین موقعیت قرار دارد و این موضوع اهمیت بالای رادیکال‌های فعال H، O و OH را در پیشرفت واکنش‌های احتراق و بالا بردن دما نشان می‌دهد.

منحنی کسر مولی گونه H_2O در شکل (c–۲) نشان داده شده است. این گونه محصول اصلی احتراق هیدروژن است. بیشترین مقدار گونه H_2O در ناحیه شعله و در موقعیتی تولید می‌شود که دما در مقدار ماکزیمم خود قرار دارد. حضور آب در ناحیه شعله باعث کاهش دما نیز می‌گردد. این کاهش دما در رقابت با افزایش دما توسط رادیکال‌های فعال در این ناحیه است. مقدار کسر مولی گونه H_2 به عنوان تنها گونه حاضر در سمت سوخت، برابر با یک است. مقدار کسر مولی گونه‌های N_2 و O_2 در سمت اکسید کننده به ترتیب برابر با ۰٫۷۹ و ۰٫۲۱ است. با نزدیک شدن به ناحیه احتراق و شروع زنجیره واکنش‌ها، این گونه‌ها مصرف شده و در ناحیه شعله کاهش می‌یابند.

منحنی تغییرات انتروپی در احتراق هیدروژن در شکل (d–۲) نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می‌شود سوخت دارای سطح انتروپی بالاتر و اکسید کننده دارای سطح انتروپی پایین‌تری است. سطح انتروپی سوخت در ناحیه شعله به شدت کاهش می‌یابد تا به مقدار سطح انتروپی اکسید کننده برسد. علت کاهش سطح انتروپی، گرمازا بودن واکنش احتراق هیدروژن است. به عبارتی انتقال گرما به محیط در ناحیه شعله باعث کاهش انتروپی می‌شود.

شکل (e–۲) منحنی تغییرات آنتالپی محسوس در احتراق هیدروژن را نشان می‌دهد. سطح آنتالپی سوخت و اکسید کننده مقدار کمی است. اما با نزدیک شدن به ناحیه شعله و شروع زنجیره واکنش‌ها سطح آنتالپی به شدت افزایش می‌یابد و مقدار ماکزیمم آن در موقعیتی نزدیک به موقعیت ماکزیمم دما اتفاق می‌افتد. مقدار آنتالپی مثبت نشان دهنده گرمازا بودن واکنش احتراق هیدروژن است.

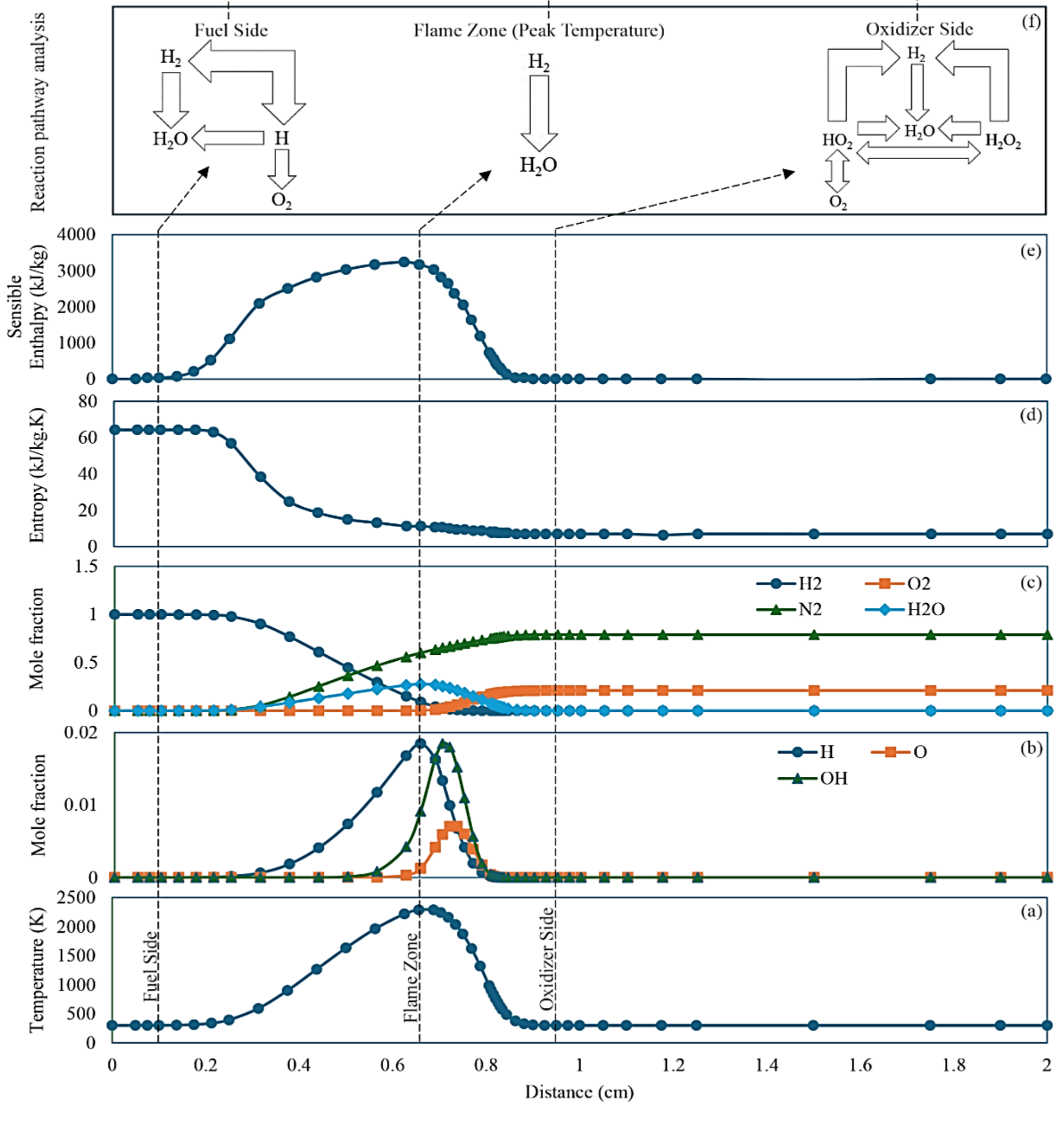
شکل (f–۲) آنالیز مسیر واکنش احتراق هیدروژن در سه ناحیه مشخص شده یعنی سمت سوخت، ناحیه شعله و سمت اکسید کننده را نشان می‌دهد. مسیرهای نشان داده شده در این شکل، مسیرهای غالب است و واکنش‌ها و گونه‌های کم اهمیت بر اساس نرخ پیشرفت واکنش، از آن حذف شده است. تحلیل مسیر واکنش در این شکل به طور همزمان به کمک واکنش‌های فعال (در هریک از نواحی سه گانه مشخص شده) شکل (g–۲) انجام گردید.

Active reactions obtained from reaction pathway analysis (g)

Fuel Side			
مسیر فعال در آنالیز مسیر واکنش	شماره واکنش	نرخ واکنش رفت	نرخ واکنش برگشت
$H_2 \leftrightarrow H$	2	1.68E-11	-3.93E-69
	3	1.52E-11	-3.54E-69
	4	8.65E-17	-2.02E-74
	10	7.36E-18	-3.02E-23
	17	4.51E-19	-3.75E-50
	12	2.25E-19	-2.50E-26
	19	6.96E-22	-3.08E-29
$H_2 \rightarrow H_2O$	10	7.36E-18	-3.02E-23
$H \rightarrow O_2$	17	4.51E-19	-3.75E-50
$H \rightarrow H_2O$	5	3.29E-21	-3.15E-84

Flame Zone (Peak Temperature)			
مسیر فعال در آنالیز مسیر واکنش	شماره واکنش	نرخ واکنش رفت	نرخ واکنش برگشت
$H_2 \rightarrow H_2O$	10	7.36E-18	-3.02E-23

Oxidizer Side			
مسیر فعال در آنالیز مسیر واکنش	شماره واکنش	نرخ واکنش رفت	نرخ واکنش برگشت
$H_2 \rightarrow H_2O$	10	9.26E-9	-3.55E-18
$H_2O_2 \rightarrow H_2O$	20	1.47E-8	-1.34E-23
$HO_2 \rightarrow H_2O$	13	5.85E-8	-9.57E-39
$HO_2 \leftrightarrow H_2O_2$	18	6.3E-8	-1.13E-23
	20	1.47E-8	-1.34E-23
	19	2.74E-13	-5.83E-19
$HO_2 \leftrightarrow O_2$	17	1.47E-10	-6.22E-32
	15	4.76E-8	-3.95E-34
	13	5.85E-8	-9.57E-39
	18	6.3E-8	-1.13E-23
	1	8.35E-8	-1.4E-27
$HO_2 \rightarrow H_2$	17	1.47E-10	-6.22E-32
$H_2O_2 \rightarrow H_2$	19	2.74E-13	-5.83E-19



شکل ۲ منحنی a) دما، b) کسر مولی گونه‌های O، H و OH، c) کسر مولی گونه‌های H_2، N_2، O_2 و H_2O، d) انتروپی، e) آنتالپی محسوس، f) آنالیز مسیر واکنش احتراق هیدروژن و g) واکنش‌های فعال در سمت سوخت، ناحیه شعله و سمت اکسید کننده

($P=1$ atm, $T_{ambient}=300$ K, $T_{fuel}=300$ K, $T_{Oxidizer}=300$ K, $V_{fuel}=100$ cm/s, $V_{Oxidizer}=100$cm/s)

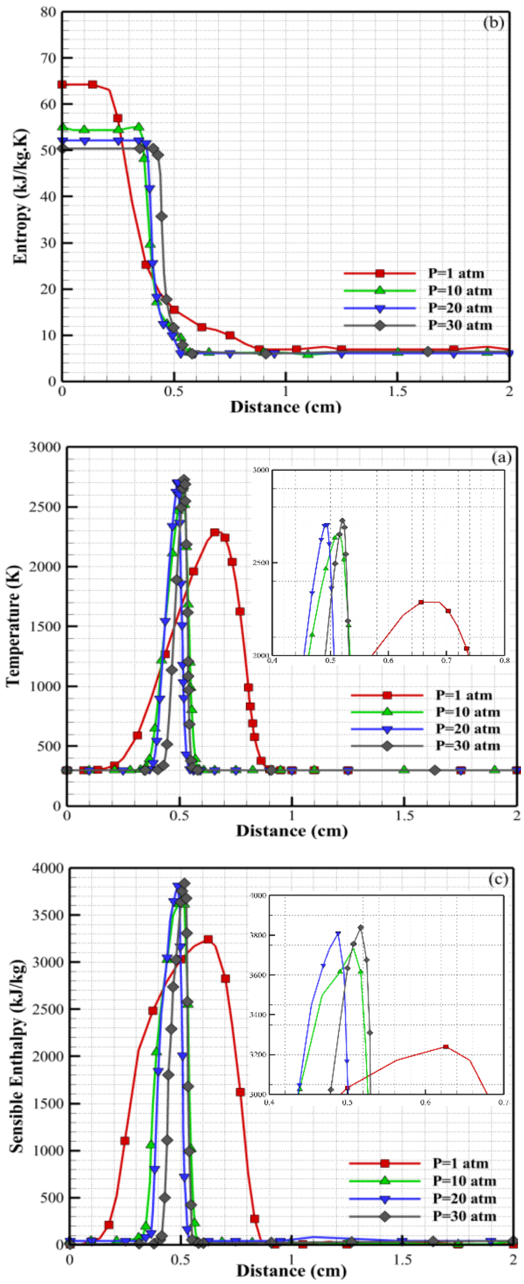
مهم‌ترین مسیر واکنش در آنالیز واکنش سمت سوخت، $H_2 \leftrightarrow H$ است که در آن بر اساس واکنش‌های ۲ تا ۴، ۱۰، ۱۲، ۱۷ و ۱۹ میزان بسیار زیادی رادیکال فعال H و OH تولید می‌شود. در این واکنش‌ها گونه‌های H_2 و H به صورت رفت و برگشت به یکدیگر تبدیل می‌شوند. اما همان طور که در شکل (۲-g) مشاهده می‌شود، نرخ انجام واکنش‌های برگشت مذکور که منجر

به تولید گونه H_2 می‌گردد، بسیار پایین‌تر از نرخ انجام واکنش‌های رفت است. بنابراین تولید زیاد رادیکال‌های فعال در این ناحیه می‌تواند آغاز کننده بسیار خوبی برای احتراق هیدروژن باشد. مسیرهای بعدی $H_2 \rightarrow H_2O$ و $H \rightarrow H_2O$ است که در آن بر اساس واکنش‌های ۵ و ۱۰ مقدار کمی محصول نهایی یعنی آب در این ناحیه تولید می‌شود. مسیر نهایی ($H \rightarrow O_2$) تولید اکسیژن بر اساس واکنش ۱۷ است که در آن مقدار کمی O_2 تولید می‌شود. حضور O_2 در مجاورت سوخت به پیشرفت واکنش و تشکیل ناحیه شعله کمک می‌کند.

آنالیز مسیر واکنش در ناحیه شعله نشان می‌دهد که مسیر غالب در این ناحیه، $H_2 \rightarrow H_2O$ است. در این مسیر بر اساس واکنش ۱۰، اتم‌های سوخت در برخورد با تعداد زیادی از رادیکال‌های فعال OH منجر به تولید محصول نهایی یعنی آب می‌گردد. همان طور که در شکل (c-۲) نیز شرح داده شد، بیشترین میزان H_2O در این ناحیه تولید می‌شود.

آنالیز مسیر واکنش در سمت اکسید کننده کمی پیچیده‌تر است و واکنش‌ها در آن با نرخ بیشتری انجام می‌شود. علت این موضوع اضافه شدن رادیکال آزاد O ناشی از شکست زنجیره اتم‌های O_2 در سمت اکسید کننده است. در آنالیز این ناحیه گونه‌های H_2، H_2O_2 و H_2O ($H_2 \rightarrow H_2O$، $H_2O_2 \rightarrow H_2O$ و $HO_2 \rightarrow H_2O$) طی واکنش‌های ۱۰، ۱۳ و ۲۰ به تولید H_2O می‌انجامد. گونه‌های H_2O_2 و HO_2 در یک مسیر برگشتی ($H_2O_2 \rightarrow H_2$ و $HO_2 \rightarrow H_2$) گونه H_2 را باز تولید می‌کنند (واکنش‌های ۱۷ و ۱۹). علاوه بر این، گونه‌های H_2O_2 و HO_2 در واکنش‌های ۱۸، ۱۹ و ۲۰ به طور رفت و برگشت یکدیگر را تولید و مصرف می‌کنند که بر اساس مقدار نرخ انجام واکنش‌های رفت و برگشت، میزان تولید H_2O_2 بیشتر است ($HO_2 \leftrightarrow H_2O_2$). در نهایت HO_2 از طریق واکنش‌های ۱، ۱۳، ۱۵، ۱۷ و ۱۸ به میزان زیادی O_2 تولید می‌کند. این گونه طی واکنش‌های برگشت به میزان کمی باز تولید می‌شود. تولید گونه O_2 در این مرحله نقش به سزایی در تولید رادیکال فعال O در مجاورت ناحیه شعله دارد که به افزایش نرخ واکنش‌ها در ناحیه شعله کمک می‌کند.

اثر پارامترهای عملکردی احتراق هیدروژن بر تولید انتروپی و تغییرات آنتالپی. شکل (۳) اثر تغییر فشار بر دما، انتروپی و آنتالپی محسوس را نشان می‌دهد. نمودارهای این شکل بر حسب فاصله بین دهانه دو نازل رسم شده است.



شکل ۳ اثر فشار بر تغییرات دما، انتروپی و آنتالپی محسوس بر حسب فاصله بین دهانه دو نازل

($T_{ambient}$=300 K, T_{fuel}=300 K, $T_{Oxidizer}$=300 K, V_{fuel}=100 cm/s, $V_{Oxidizer}$=100cm/s)

همان طور که در شکل (a-۳) مشاهده می‌شود، افزایش فشار باعث افزایش ماکزیمم دما می‌شود که این افزایش به علت افزایش شکست زنجیره اتم‌ها و تولید رادیکال‌های فعال O، H و OH است که منجر به افزایش نرخ واکنش‌ها شده و در نتیجه ماکزیمم دما افزایش می‌یابد. به علت افزایش رادیکال‌های فعال، موقعیت ماکزیمم دما به سمت سوخت حرکت می‌کند. علاوه بر آن همان

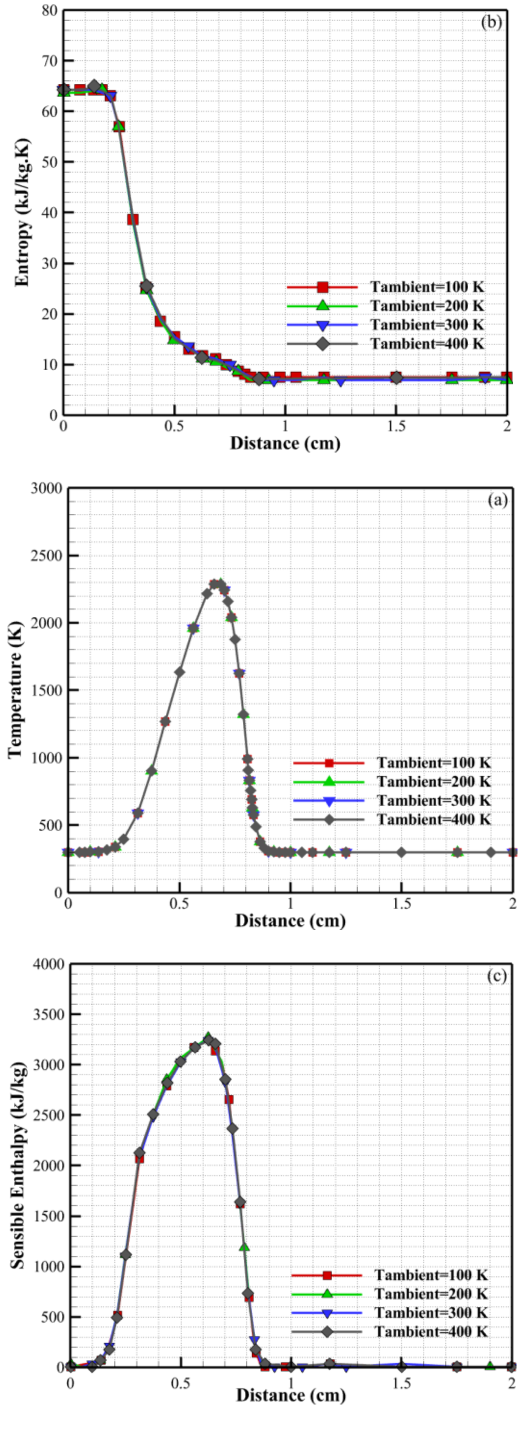
طور که در این شکل مشاهده می‌شود، عرض ناحیه شعله با افزایش فشار کاهش می‌یابد و دهانه نمودار در ناحیه ماکزیمم دما باریک‌تر شده است. نرخ افزایش ماکزیمم دما با افزایش بیشتر فشار، روندی کاهشی دارد و در صورت ادامه روند افزایش فشار، ماکزیمم دما به مقدار کمی افزایش خواهد یافت.

افزایش فشار باعث کاهش سطح انتروپی گردید (شکل b–۳). افزایش فشار با کاهش بی نظمی و حرکت کاتوره‌ای مولکول‌ها و اتم‌ها منجر به کاهش سطح انتروپی می‌گردد. از طرف دیگر افزایش دما به دلیل افزایش فشار که در شکل (a–۳) توضیح داده شد، باعث انتقال بیشتر گرما به محیط شده و سطح انتروپی را کاهش می‌دهد. روند کاهش انتروپی با افزایش فشار به تدریج کاهش می‌یابد.

در شکل (c–۳) افزایش فشار باعث افزایش آنتالپی محسوس گردیده است. افزایش فشار با افزایش نرخ انجام واکنش‌ها، دما و متعاقب آن تولید گرمای بیشتر منجر به افزایش آنتالپی می‌گردد. روند افزایش آنتالپی با افزایش فشار به تدریج کاهش می‌یابد.

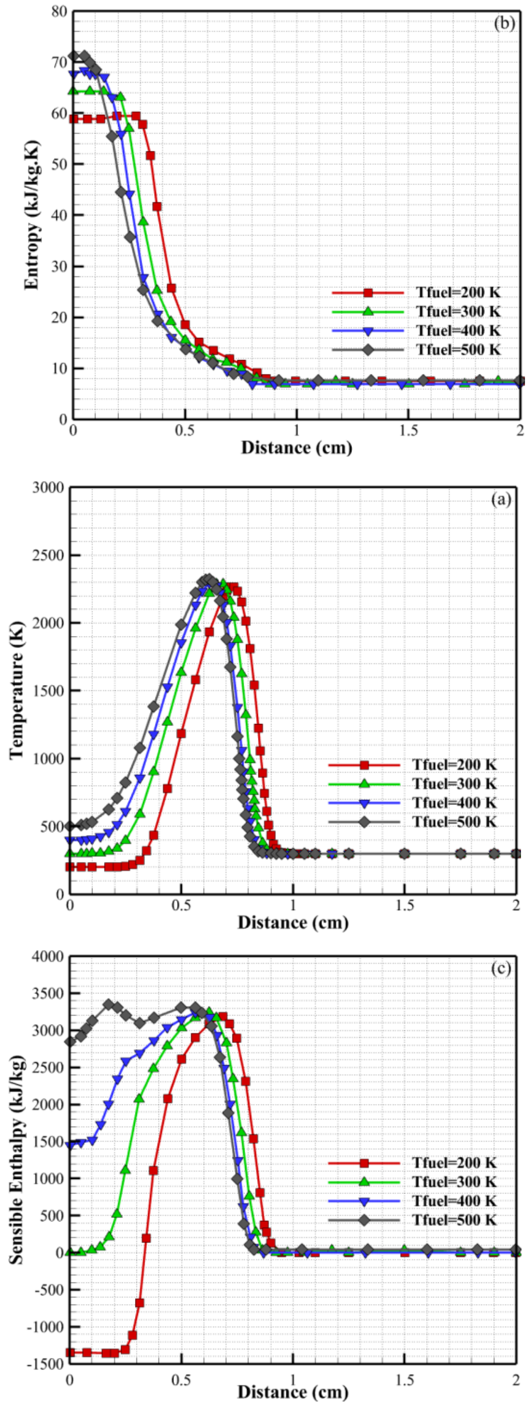
اثر تغییر دمای محیط بر دما، انتروپی و آنتالپی محسوس در شکل (۴) نشان داده شده است. به طور کلی افزایش دمای محیط از ۱۰۰K تا ۴۰۰K اثر قابل توجهی بر دما، انتروپی و آنتالپی محسوس ندارد. با توجه به این که دمای احتراق هیدروژن بسیار بالاتر از سطح دمای محیط و در حدود ۲۵۰۰K است، افزایش دمای محیط در این سطح تأثیر چندانی ندارد. صرف نظر از این که امکان بالا بردن دمای محیط تا سطح دمای احتراق وجود ندارد، به لحاظ فیزیکی نیز منطقی به نظر نمی‌رسد. بنابراین دماهای محیط بالاتر در این پژوهش بررسی نگردید.

شکل (۵) اثر تغییر دمای ورودی سوخت بر دما، انتروپی و آنتالپی محسوس را نشان می‌دهد. همان طور که در شکل (a–۵) مشاهده می‌شود، افزایش دمای ورودی سوخت ماکزیمم دما را افزایش می‌دهد. افزایش دمای ورودی سوخت علاوه بر این که با افزایش دمای گونه H_2 منجر به افزایش نرخ واکنش‌های تولید کننده رادیکال‌های فعال H و OH می‌شود، با افزایش دمای ناحیه شعله نیز منجر به افزایش نرخ انجام واکنش کلی احتراق می‌شود. بنابراین ماکزیمم دمای احتراق افزایش می‌یابد. نکته دیگری که در این جا مطرح می‌شود حرکت موقعیت ماکزیمم دما به سمت سوخت است که به دلیل افزایش نرخ تولید رادیکال‌های فعال در سمت سوخت به دلیل افزایش دمای ورودی سوخت است. افزایش دمای ورودی سوخت از طریق افزایش دما، افزایش جنبش مولکولی و سطح انرژی به افزایش سطح انتروپی سوخت نیز می‌انجامد (شکل b–۵). سطح انتروپی در ناحیه شعله با افزایش دمای ورودی سوخت کاهش یافت که به دلیل افزایش انتقال حرارت به محیط در این ناحیه است.



شکل ۴ اثر دمای محیط بر تغییرات دما، انتروپی و آنتالپی محسوس بر حسب فاصله بین دهانه دو نازل

($P=1$ atm, $T_{fuel}=300$ K, $T_{Oxidizer}=300$ K, $V_{fuel}=100$ cm/s, $V_{Oxidizer}=100$ cm/s)



شکل ۵ اثر دمای ورودی سوخت بر تغییرات دما، انتروپی و آنتالپی محسوس بر حسب فاصله بین دهانه دو نازل

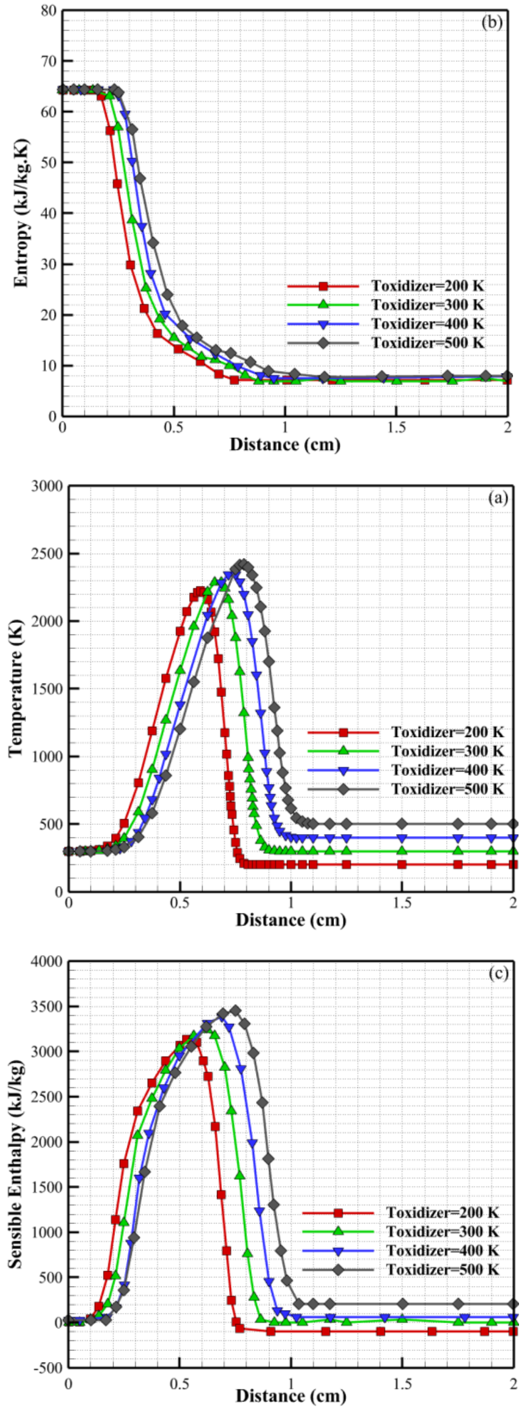
($P=1$ atm, $T_{ambient}=300$ K, $T_{Oxidizer}=300$ K, $V_{fuel}=100$ cm/s, $V_{Oxidizer}=100$cm/s)

در رابطه با اثر تغییر دمای ورودی سوخت بر آنتالپی محسوس چند نکته حائز اهمیت است (شکل c–۵). نکته اول این که در دمای ورودی سوخت ۲۰۰K سطح آنتالپی کمتر از صفر است و آنتالپی منفی یعنی فرایند گرماگیر بوده است. علت این موضوع آن است که دمای ورودی سوخت کمتر از دمای محیط (۳۰۰K) بوده و بنابراین برای شروع فرایند از محیط گرما جذب کرده است.

نکته دوم این که افزایش دمای ورودی سوخت منجر به افزایش ماکزیمم آنتالپی می‌گردد که به علت افزایش دما، افزایش نرخ تولید رادیکال‌های فعال و در نهایت افزایش نرخ انجام واکنش‌ها است. نکته سوم مربوط به منحنی آنتالپی در دمای ورودی سوخت ۵۰۰K است که دارای دو نقطه ماکزیمم است. یکی در ناحیه شعله و دیگری قبل از ناحیه شعله و در سمت سوخت. علت این موضوع آن است که بالا بردن دمای سوخت تا سطح ۵۰۰K باعث شده است که سوخت قبل از موقعیت ناحیه شعله دچار پیش اشتعالی یا خودسوزی شود. به همین دلیل این منحنی دارای دو نقطه ماکزیمم است.

اثر تغییر دمای ورودی اکسید کننده بر دما، انتروپی و آنتالپی محسوس در شکل (۶) نشان داده شده است. همان طور که در شکل (a–۶) مشاهده می‌شود، افزایش دمای ورودی اکسید کننده ماکزیمم دما را افزایش می‌دهد. میزان افزایش ماکزیمم دما در این حالت بیشتر است نسبت به حالتی که دمای ورودی سوخت افزایش یافت (شکل a–۵). افزایش دمای ورودی اکسید کننده با افزایش دمای گونه O_2 منجر به افزایش نرخ واکنش‌های تولید کننده رادیکال فعال O می‌شود که در کنار رادیکال‌های فعال H و OH افزایش بیشتر دما را منجر می‌شود. افزایش دمای ناحیه شعله نیز منجر به افزایش نرخ انجام واکنش کلی احتراق و در نتیجه افزایش ماکزیمم دما می‌شود.

نکته دیگری که در این جا قابل توجه است حرکت موقعیت ماکزیمم دما به سمت اکسید کننده است که به دلیل افزایش نرخ تولید رادیکال فعال O در سمت اکسید کننده به دلیل افزایش دمای ورودی اکسید کننده است. بر خلاف تأثیر قابل توجه افزایش دمای ورودی سوخت بر انتروپی (شکل b–۵)، افزایش دمای ورودی اکسید کننده تأثیر قابل توجهی بر سطح انتروپی سوخت و اکسید کننده ندارد و تنها تأثیر آن افزایش انتروپی در ناحیه شعله است (شکل b–۶). این اثر از طریق افزایش دما، افزایش جنبش مولکولی و سطح انرژی صورت می‌پذیرد.



شکل ۶ اثر دمای ورودی اکسید کننده بر تغییرات دما، انتروپی و آنتالپی محسوس بر حسب فاصله بین دهانه دو نازل

($P=1$ atm, $T_{ambient}=300$ K, $T_{fuel}=300$ K, $V_{fuel}=100$ cm/s, $V_{Oxidizer}=100$cm/s)

افزایش دمای ورودی اکسید کننده نیز به افزایش ماکزیمم سطح آنتالپی محسوس می‌انجامد (شکل ۶-c). در سطح دمای ورودی اکسید کننده ۲۰۰K مقدار آنتالپی منفی است و این به معنی گرماگیر بودن فرایند در سمت اکسید کننده است. اما سطح آنتالپی در این جا نسبت به سطح آنتالپی در دمای ورودی سوخت ۲۰۰K بالاتر است که به دلیل حضور کمتر رادیکال‌های فعال H و OH در سمت اکسید کننده است. با افزایش دمای اکسید کننده تا ۵۰۰ هیچ گونه پیش اشتعالی یا خودسوزی در سوخت رخ نمی‌دهد زیرا تأثیر افزایش دمای ورودی اکسید کننده در ازدیاد تولید گونه‌ها و رادیکال‌های فعال به اندازه تأثیر افزایش دمای ورودی سوخت نیست.

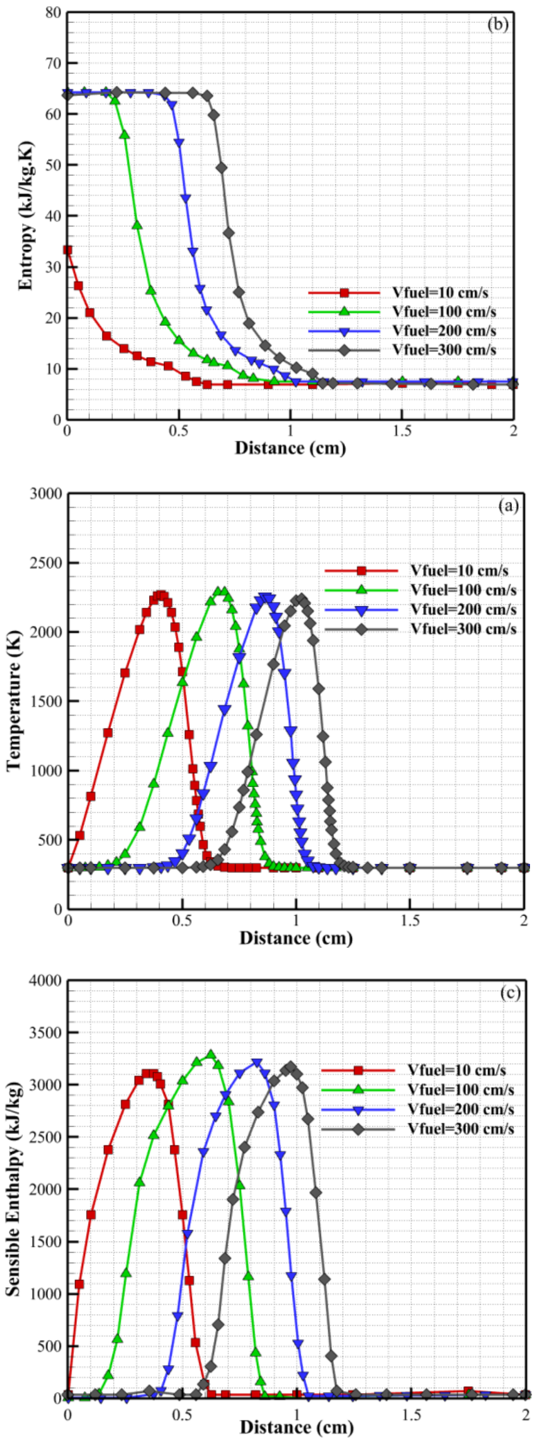
شکل (۷) اثر تغییر سرعت ورودی سوخت بر دما، انتروپی و آنتالپی محسوس را نشان می‌دهد. همان طور که در شکل (۷-a) مشاهده می‌شود، افزایش سرعت ورودی سوخت تأثیر چشمگیری بر مقدار ماکزیمم دما ندارد و حتی در سرعت‌های بالا منجر به اندکی کاهش ماکزیمم دما می‌گردد که می‌تواند به علت کاهش دمای ناحیه شعله به علت سرعت زیاد جریان سوخت و کاهش نرخ انجام واکنش‌ها باشد.

موقعیت ماکزیمم دما در شکل (۷-a) با افزایش سرعت ورودی سوخت به سمت اکسید کننده جا به جا می‌شود که این به علت افزایش مومنتم ورودی سوخت و انتقال ناحیه شعله به سمت اکسید کننده است. نکته قابل توجه در این شکل آن است که در سرعت ورودی سوخت ۱۰cm/s، مومنتم سوخت به حدی کم است که ناحیه شعله در دهانه نازل سوخت شکل گرفته است و روند افزایشی منحنی دما از x=۰cm آغاز شده است.

دقت در شکل (۷-b) نشان می‌دهد که افزایش سرعت ورودی سوخت تأثیر چندانی بر سطح انتروپی در سمت سوخت و اکسید کننده ندارد. اما در ناحیه شعله سطح انتروپی افزایش یافته است. با توجه به انتقال ناحیه شعله به سمت اکسید کننده با افزایش سرعت ورودی سوخت، شروع روند کاهشی سطح انتروپی در منحنی‌های این شکل با افزایش سرعت ورودی سوخت به تاخیر افتاده است. نکته قابل توجه در این جا نیز منحنی مربوط به سرعت ورودی سوخت ۱۰cm/s است که روند کاهشی آن به سرعت و از دهانه نازل سوخت (x=۰cm) آغاز شده است که به دلیل شکل گیری ناحیه شعله از دهانه نازل سوخت است.

تغییرات آنتالپی محسوس بر اثر افزایش سرعت ورودی سوخت نیز همانند تغییرات دما ناچیز است و حتی در سرعت‌های بالا منجر به کاهش ماکزیمم مقدار آنتالپی شده است (شکل -c

۷). علت این موضوع همان طور که پیش‌تر گفته شد می‌تواند به علت کاهش دمای ناحیه شعله به علت سرعت زیاد جریان سوخت و کاهش نرخ انجام واکنش‌ها باشد.



شکل ۷ اثر سرعت ورودی سوخت بر تغییرات دما، انتروپی و آنتالپی محسوس بر حسب فاصله بین دهانه دو نازل
(P=1 atm, $T_{ambient}$=300 K, T_{fuel}=300 K, $T_{Oxidizer}$=300 K, $V_{Oxidizer}$=100cm/s)

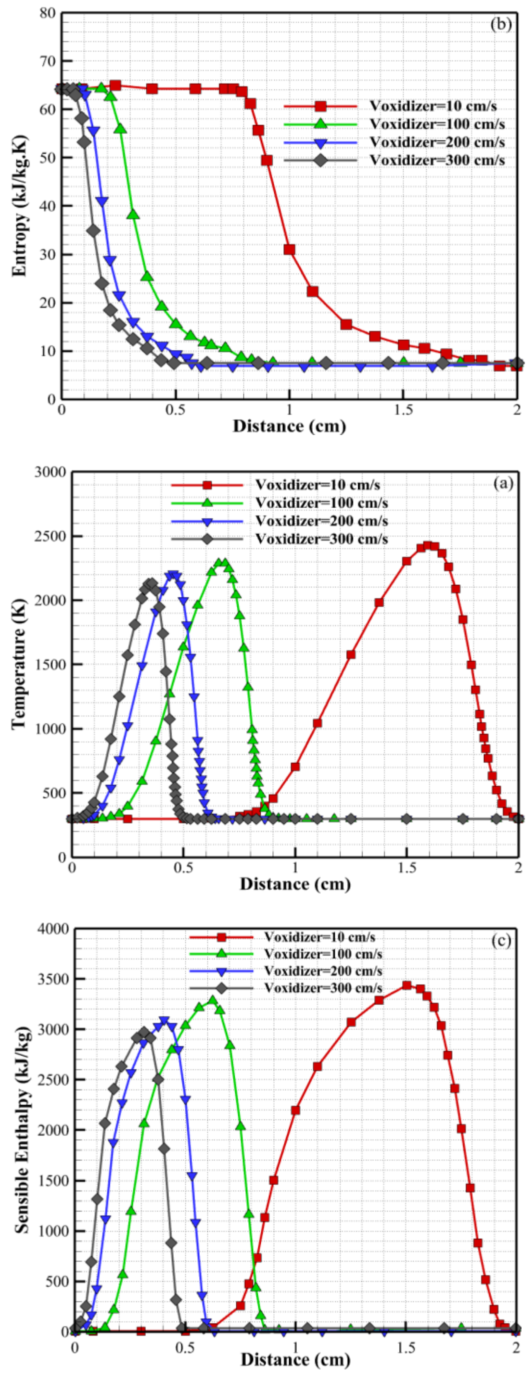
بررسی اثر تغییر سرعت ورودی اکسید کننده بر دما، انتروپی و آنتالپی محسوس در شکل (۸) مشاهده می‌شود. افزایش سرعت ورودی جریان اکسید کننده باعث کاهش ماکزیمم دما می‌شود (شکل a–۸). این موضوع چند علت دارد. اول این که افزایش سرعت جریان اکسید کننده به خاطر خنک کنندگی ناحیه شعله منجر به کاهش دما و در نتیجه کاهش نرخ تولید رادیکال‌های فعال و در نتیجه کاهش نرخ انجام واکنش‌ها می‌شود. دوم این که در سمت اکسید کننده گونه‌های N_2 و O_2 حضور دارند و رادیکال فعال این ناحیه O است که نسبت به رادیکال‌های فعال سمت سوخت یعنی H و OH کسر مولی کمتری دارد و تأثیر کمتری در افزایش نرخ انجام واکنش‌ها دارد (شکل b–۲). سوم این که گونه N_2 که تا حد زیادی در ناحیه شعله دست نخورده باقی می‌ماند، خاصیت رقیق کنندگی دارد و علاوه بر کاهش دما از طریق رقیق سازی با انجام واکنش با رادیکال فعال O تبدیل به آلاینده NOx شده و از این طریق با کاهش نرخ انجام واکنش‌ها ماکزیمم دما را کاهش می‌دهد. شکل (c–۲) نشان می‌دهد که کسر مولی گونه N_2 در موقعیت ماکزیمم دما در ناحیه شعله در حدود ۰٫۶ است که نسبت به مقدار اولیه آن یعنی ۰٫۷۹ به مقدار کمی در واکنش‌ها شرکت کرده و مصرف شده است.

موقعیت ماکزیمم دما با افزایش سرعت ورودی اکسید کننده به سمت سوخت جا به جا می‌شود که این به علت افزایش مومنتم ورودی اکسید کننده و انتقال ناحیه شعله به سمت سوخت است. نکته قابل توجه در این شکل آن است که در سرعت ورودی اکسید کننده ۱۰cm/s، مومنتم اکسید کننده به حدی کم است که ناحیه شعله در دهانه نازل اکسید کننده شکل گرفته است و روند افزایشی منحنی دما از x=۲cm آغاز شده است.

دقت در شکل (b–۸) نشان می‌دهد که افزایش سرعت ورودی اکسید کننده تأثیر چندانی بر سطح انتروپی در سمت سوخت و اکسید کننده ندارد. اما در ناحیه شعله و بر خلاف شکل (b–۷) سطح انتروپی به شدت کاهش یافته است. با توجه به انتقال ناحیه شعله به سمت سوخت با افزایش سرعت ورودی اکسید کننده، شروع روند کاهشی سطح انتروپی در منحنی‌های این شکل با افزایش سرعت ورودی اکسید کننده به سرعت آغاز شده است.

تغییرات آنتالپی محسوس بر اثر افزایش سرعت ورودی اکسید کننده روندی کاهشی دارد (شکل c–۸) که به علت کاهش ماکزیمم دما و متعاقب آن کاهش تولید رادیکال‌های فعال و در

نتیجه کاهش نرخ انجام واکنش‌ها است. از طرفی کاهش دمای ناحیه شعله به علت سرعت زیاد جریان اکسید کننده و کاهش نرخ انجام واکنش‌ها دلیلی بر کاهش ماکزیمم آنتالپی است.



شکل ۸ اثر سرعت ورودی اکسید کننده بر تغییرات دما، انتروپی و آنتالپی محسوس بر حسب فاصله بین دهانه دو نازل

P=1 atm, $T_{ambient}$=300 K, T_{fuel}=300 K, $T_{Oxidizer}$=300 K,)
(V_{fuel}=100 cm/s

جمع‌بندی

در این تحقیق مطالعه‌ی پارامتری احتراق هیدروژن در مدل شعله نفوذی انجام و اثر پارامترهای عملکردی احتراق بر تولید انتروپی و تغییرات آنتالپی بررسی گردید. مدل مورد استفاده، جریان مخالف بوده و شبیه‌سازی به کمک نرم‌افزار شبیه‌ساز کمکین انجام شد. برخی از مهم‌ترین نتایج به دست آمده از پژوهش حاضر به شرح زیر است:

۱. سطح انتروپی در ناحیه شعله به شدت کاهش یافت که این کاهش به دلیل انتقال گرمای زیادی به محیط در ناحیه شعله است.

۲. سطح آنتالپی محسوس در ناحیه شعله به شدت افزایش یافت. مقدار مثبت آنتالپی نشان می‌دهد که فرایند واکنش احتراق در این ناحیه گرمازا است.

۳. افزایش فشار با افزایش نرخ انجام واکنش‌ها منجر به افزایش دما گردید. افزایش فشار همچنین سطح انتروپی سوخت را کاهش داد. اثر افزایش فشار بر آنتالپی محسوس به صورت افزایش مقدار ماکزیمم آنتالپی بود.

۴. تغییر دمای محیط تأثیر قابل توجهی بر دما، انتروپی و آنتالپی محسوس نداشت.

۵. افزایش دمای ورودی سوخت، ماکزیمم دما و آنتالپی محسوس را افزایش داده و سطح انتروپی سوخت افزایش یافت. اما در ناحیه شعله سطح انتروپی کاهش یافت. افزایش زیاد دمای ورودی سوخت تا سطح ۵۰۰K منجر به خودسوزی یا پیش اشتعالی سوخت قبل از رسیدن به ناحیه شعله گردید.

۶. افزایش دمای ورودی اکسید کننده ماکزیمم دما و آنتالپی محسوس را افزایش داد. اما تأثیر قابل توجهی بر سطح انتروپی سوخت و اکسید کننده نداشت. در ناحیه شعله، سطح انتروپی با افزایش دمای ورودی اکسید کننده افزایش یافت.

۷. افزایش سرعت ورودی سوخت تأثیر کمی بر مقدار ماکزیمم دما، ماکزیمم آنتالپی محسوس و سطح انتروپی سوخت و اکسید کننده داشت. اما در ناحیه شعله سطح انتروپی را افزایش داد.

۸. افزایش سرعت ورودی اکسید کننده ماکزیمم دما و آنتالپی محسوس را کاهش داد. اگر چه افزایش سرعت ورودی اکسید کننده بر سطح انتروپی سوخت و اکسید کننده تأثیر قابل توجهی نداشت، اما در ناحیه شعله منجر به کاهش سطح

انتروپی گردید.

واژه‌نامه

آنالیز مسیر واکنش	Reaction Pathway Analysis
آنتالپی	Enthalpy
اگزرژی	Exergy
انتروپی	Entropy
ترموآکوستیک	Thermoacoustic
توسعه پایدار	Sustainable Development
خودسوزی	Spontaneous Ignition
رادیکال فعال	Active Radical
شبیه‌سازی گردابی بزرگ	Large Eddy Simulation
ماژول جریان واکنش‌پذیر	Reactive Flow Module
مقیاس مزو	Mesoscale
میدان تصادفی اویلری	Eulerian Stochastic Field
میکرو احتراق دو کاناله	Double-Channel Micro-Combustor
نرم‌افزار کمکین	CHEMKIN Software
نویز	Noise
ویسکوزیته	Viscosity

تقدیر و تشکر

مراجع

[1] A. Asadi and M. Yadegari, “The study of the effect of fuel dilution in methane/air counterflow diffusion flames on the emission of environmental pollutants,” *Journal of Mechanical Engineering*, vol. 33, no. 6, pp. 25–34, 2024. [In Persian] https://doi.org/10.30506/mmep.2024.2025565.2166

[2] J. Khadem and A. Asadi, “Numerical study on counterflow diffusion flames of natural gas with CO_2 dilution,” *Fuel and Combustion*, vol. 4, no. 2, pp. 17–28, 2012. [In Persian]

[3] A. Asadi, "The Study of the Effect of Lewis Number on the Laminar Diffusion Flames," *Journal of Mechanical Engineering*, vol. 33, no. 5, pp. 3-13, 2024. [In Persian] https://doi.org/10.30506/mmep.2024.2033635.2180

[4] A. Asadi and J. Khadem, "The Numerical Study of Extinction Limits and Structure of H_2/O_2 Counterflow Diffusion Flame with Ar and He Dilution," *Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, vol. 24, no. 2, 2013, [In Persian]

[5] L. Acampora and F. S. Marra, "Effects of Soret diffusion on the exergy losses in hydrogen laminar premixed flames," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 48, no. 73, pp. 28539-28548, 2023. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2023.03.168

[6] D. Jiang, W. Yang, and J. Teng, "Entropy generation analysis of fuel lean premixed CO/H_2/air flames," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 40, no. 15, pp. 5210-5220, 2015. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.02.082

[7] J. Zhang, A. Zhong, Z. Huang, and D. Han, "Second-law thermodynamic analysis in premixed flames of ammonia and hydrogen binary fuels," *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, vol. 141, no. 7, p. 071007, 2019. https://doi.org/10.1115/1.4042412

[8] L. Acampora and F. S. Marra, "Second law thermodynamic analysis of syngas premixed flames," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 45, no. 21, pp. 12185-12202, 2020. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.02.142

[9] F. Pan, J. Zhang, D. Han, and T. Lu, "Numerical study on exergy losses of iso-octane constant-volume combustion with water addition," *Fuel*, vol. 248, pp. 127-135, 2019. https://doi.org/10.1016/j.fuel.2019.03.068

[10] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, and R. B. Bird, *Molecular theory of gases and liquids*. Wiley New York, 1964.

[11] H. Wu, W. Huang, H. Zhao, W. Sun, Z. Huang, and Y. Zhang, "Laminar Flame Structure-Dependent Exergy Destruction Behavior at Auto-Ignition Time Scale: A Case Study of Dimethyl Ether (DME)," *Journal of Thermal Science*, pp. 1-15, 2024. https://doi.org/10.1007/s11630-024-1924-1

[12] J. Zhang, D. Han, and Z. Huang, "Second-law thermodynamic analysis for premixed hydrogen flames with diluents of argon/nitrogen/carbon dioxide," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 44, no. 10, pp. 5020-5029, 2019. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.01.041

[13] Y. Liu, J. Zhang, D. Ju, Z. Huang, and D. Han, "Analysis of exergy losses in laminar premixed flames of methane/hydrogen blends," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 44, no. 43, pp. 24043-24053, 2019. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.07.123

[14] K. Nishida, T. Takagi, and S. Kinoshita, "Analysis of entropy generation and exergy loss during combustion," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 29, no. 1, pp. 869-874, 2002. https://doi.org/10.1016/S1540-7489(02)80111-0

[15] S. Xue, Y. Tang, W. Han, and L. Yang, "Effects of strain and pressure on entropy generation in laminar flames," *Combustion and Flame*, vol. 269, p. 113688, 2024. https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2024.113688

[16] B. Zhao, "Entropy transfer efficiency-effectiveness method for heat exchangers, part 1: Local entropy generation number and operation performance limits," *Energy*, vol. 304, p. 132133, 2024. https://doi.org/10.1016/j.energy.2024.132133

[17] H. Rong and D. Zhao, "Thermodynamic and entropy generation analyses of Telsa-valve structured meso-scale combustors fuelled with hydrogen for thermophotovoltaic applications," *Energy*, p. 132788, 2024. https://doi.org/10.1016/j.energy.2024.132788

[18] P. Badhuk and R. Ravikrishna, "Flame inhibition by aqueous solution of Alkali salts in methane and LPG laminar diffusion flames," *Fire Safety Journal*, vol. 130, p. 103586, 2022. https://doi.org/10.1016/j.firesaf.2022.103586

[19] H. Zhao, D. Zhao, and S. Becker, "Entropy production and enhanced thermal performance studies on counter-flow double-channel hydrogen/ammonia-fuelled micro-combustors with different shaped internal threads," *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 47, no. 85, pp. 36306-36322, 2022. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.08.168

[20] A. Sadiki, S. Agrebi, and F. Ries, "Entropy Generation Analysis in Turbulent Reacting Flows and Near Wall: A Review," *Entropy*, vol. 24, no. 8, p. 1099, 2022. https://doi.org/10.3390/e24081099

[21] L. Dressler, H. Nicolai, S. Agrebi, F. Ries, and A. Sadiki, "Computation of entropy production in stratified flames based on chemistry tabulation and an eulerian transported probability density function approach," *Entropy*, vol. 24, no. 5, p. 615, 2022. https://doi.org/10.3390/e24050615

[22] H. Yan, G. Tang, C. Wang, L. Li, Y. Zhou, Z. Zhang, and C. Lou, "Thermodynamics irreversibilities analysis of oxy-fuel diffusion flames: The effect of oxygen concentration," *Entropy*, vol. 24, no. 2, p. 205, 2022. https://doi.org/10.3390/e24020205

[23] M. Mohammadi and M. S. Abedinejad, "Analysis of NO Formation and Entropy Generation in a Reactive Flow," *Aerospace*, vol. 9, no. 11, p. 666, 2022. https://doi.org/10.3390/aerospace9110666

[24] C.-R. Yu and C.-Y. Wu, "An empirical formula to predict the overall irreversibility of counter-flow premixed flames

of methane and its mixtures," *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, vol. 147, no. 24, pp. 14587-14599, 2022. https://doi.org/10.1007/s10973-022-11573-4

[25] R. N. Kumar, S. M. Kumaran, and V. Raghavan, "Numerical analysis of structure, stability and entropy generation in biogas coflow diffusion flames," *Archive of Mechanical Engineering*, pp. 99-128-99-128, 2022. https://doi.org/10.24425/ame.2021.139648

[26] R. Stephen, "Turns. An introduction to combustion: concepts and applications," *Mechanical Engineering Series. McGraw Hill*, p. 51, 2000.

[27] A. E. Lutz, R. J. Kee, J. F. Grcar, and F. M. Rupley, "OPPDIF: A Fortran program for computing opposed-flow diffusion flames," Sandia National Lab.(SNL-CA), Livermore, CA (United States), 1997. https://doi.org/10.2172/568983